# Projet P3 LFSAB1503: Rapport de la première tâche

Groupe 1246

24 septembre 2014

## Equation de la réaction et bilan de matière

Il nous est demandé de rechercher la quantité des différents composés nécessaire à la synthèse de l'ammoniac. Il nous était dit que l'ammoniac pouvait être obtenu à partir de dihydrogène  $(H_2)$  et de diazote  $(N_2)$ . Nous sommes donc arrivés à l'équation de synthèse de l'ammoniac suivante :

$$\mathrm{N_{2(g)}} + 3\,\mathrm{H_{2(g)}} \longrightarrow 2\,\mathrm{NH_{3(g)}}$$

La masse molaire de l'ammoniac étant de 17 g/mol, nous en avons déduit que une masse de 1000 t correspondait à  $\frac{10^9}{17}$  mol. Nous avons ensuite fait un tableau d'avancement de la réaction, où les données sont exprimées en moles.

	$N_{2(g)}$	$3H_{2(g)}$	$2NH_{3(g)}$
Initial	$\frac{10^9}{17} \cdot \frac{1}{2}$	$\frac{10^9}{17} \cdot \frac{3}{2}$	0
Réaction	$-\frac{10^9}{17} \cdot \frac{1}{2}$	$-\frac{10^9}{17} \cdot \frac{3}{2}$	$+\frac{10^9}{17}$
Final	0	0	$\frac{10^9}{17}$

Figure 1 – Tableau d'avancement de la réaction

La réaction se produisant en continu, on peut calculer des flux de quantité par seconde. On obtient selon nos calculs:

- une consommation de  $N_2$  égale à :  $\frac{10^9}{17} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3600 \cdot 24} \cong 340.41 \text{ mol/s.}$  une consommation de  $H_2$  égale à :  $\frac{10^9}{17} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{3600 \cdot 24} \cong 1021.241 \text{ mol/s.}$  une production de  $NH_3$  égale à :  $\frac{10^9}{17} \cdot \frac{1}{3600 \cdot 24} \cong 680.827 \text{ mol/s.}$

# Aspect thermique

Selon nos recherches, nous avons trouvé que la réaction était exothermique  $(\Delta H_{react}(25 \text{ °C}) = -92.2kJ)$ . Il nous était indiqué que la température du réacteur devait être maintenue à 500 °C et que celui-ci, vu le caractère exothermique de la réaction, pouvait être refroidi par un débit continu d'eau, dont la température variait entre 25 °C et 90 °C.

#### Calcul de volume d'eau nécessaire (pour une mole produite)

Il nous faut déterminer l'enthalpie de la réaction à 500 °C, c'est-à-dire 773.15 K. Nous l'obtenons comme suit :

$$\Delta H(773.15~{\rm K}) = \Delta H_{NH_2}(298.15~{\rm K}) + \int_{298.15}^{773.15} C_{p,NH_2} dT - \frac{1}{2} [\Delta H_{N_2}(298.15~{\rm K})$$

$$+ \int_{298.15}^{773.15} C_{p,N_2} dT] - \frac{3}{2} [\Delta H_{H_2}(298.15 \text{ K}) + \int_{298.15}^{773.15} C_{p,H_2} dT]$$

Il est important de préciser que les  $C_p$  sont les constantes calorifiques massiques des différents composants. Nous trouvons leur valeur ainsi que celles des enthalpies dans le livre de référence <sup>1</sup>. Nous obtenons finalement une différence d'enthalpie d'approximativement -57 kJ.

Nous savons que:

$$q = C_p \cdot dT$$

Au vu des indications données, en supposant que nous travaillons à pression constante, en supposant que la température initiale de réacteur est de 500 °C, il vient :  $-57000 \cdot 680.827 = 4.180 \cdot 65 \cdot d_{H_2O} \Rightarrow d_{H_2O} = 142830 \text{ g/s} = 142.830 \text{ kg/s}$  Etant donné qu'un kilogramme d'eau représente 1 L, cela équivaut à 142.830 L/s.

#### Source des réactifs

#### Le diazote

Dans des conditions normales, le diazote est le composant majoritaire de l'air, étant donné qu'il y est présent à 72 %. Un moyen pour obtenir du diazote est de compresser et refroidir l'air pour arriver à le liquéfier. Les différents compostants sont ensuite distillés afin de le séparer. Ce procédé est connu sous le nom de "cryogénique". <sup>2</sup> D'autres méthodes sont celle de la perméation gazeuse, ou celle de RAMSAY; mais ces méthodes sont nettement moins utilisées et le diazote résultant est de qualité moindre par rapport au procédé cryogénique.

#### Le dihydrogène

Actuellement, la plus grande source de dihydrogène est le reformage de gaz naturel. Le méthane accompagné d'un catalyseur vont mener à l'obtention de différents gaz, dont le dihydrogène. C'est malheureusement une technique qui rejette une quantité de  $CO_2$  non-négligeable.

<sup>1.</sup> Principes de chimie - P. ATKINS et L.JONES, 2e édition, 2013

<sup>2.</sup> Source : « Société Chimique de France - Le réseau des chimistes ». Consulté le 23 septembre 2014. http://www.societechimiquedefrance.fr/.

L'électrolyse de l'eau est également une alternative pour la production de dihydrogène. <sup>3</sup> C'est un moyen respectueux de l'environnement utilisant de l'eau déminéralisée qui sera dissociée au moyen d'un courant électrique. Les bulles de gaz formées seront séparées et filtrées, pour arriver à un gaz de bonne qualité. Mais cette technique ne permet qu'une production en petites quantités, et n'est donc pas tellement utilisée.

### Bilan de matière

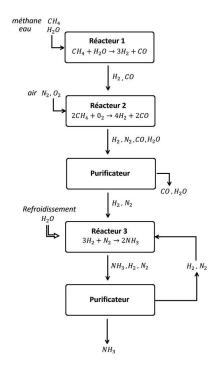


Figure 2 – Flowsheet production ammoniac

<sup>3.</sup> « Hydrogène > Air Liquide in BELGIUM and LUXEMBOURG ». Consulté le 23 septembre 2014. http://www.airliquide.be/fr/applications-des-gaz/hydrogene-1.html.